

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛАБОГО ФЕРРОМАГНЕТИЗМА В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ $\text{MnCO}_3$ , $\text{CoCO}_3$ , $\text{NiCO}_3$

Клочко Н.М., Мазуренко В.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: [klochko.n.m@gmail.com](mailto:klochko.n.m@gmail.com)

## WEAK FERROMAGNETISM MODELLING IN ANTIFERROMAGNETS $\text{MnCO}_3$ , $\text{CoCO}_3$ , $\text{NiCO}_3$

Klochko N.M., Mazurenko V.V.

Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

We report on the results of the first-principles calculations of  $\text{CoCO}_3$  and  $\text{NiCO}_3$  carried out by using an all-electron full-potential linearised augmented-plane wave code (Elk FP-LAPW). In LDA+U approximation the spectral functions and local magnetic moments on metal atoms were obtained. By taking into account spin-orbit coupling in LDA+U+SO approximation the canting angle governed by Dzyaloshinskii-Moriya interaction was calculated.

Карбонаты переходных металлов являются антиферромагнетиками со слабым ферромагнетизмом. Отклонение магнитных моментов подрешёток от идеальной антиферромагнитной конфигурации является следствием релятивистского взаимодействия Дзялошинского-Мория, описанного в работах [1], [2], которое имеет вид

$$H_{12} = \vec{D}[\vec{S}_1 \times \vec{S}_2] \quad (1)$$

Целью данной работы является моделирование слабого ферромагнетизма при помощи первопринципных методов в карбонатах Mn, Co, Ni и получение характеристик, наблюдаемых экспериментально.

Для расчёта электронной структуры используется программа Elk FP-LAPW, в которой реализуется метод функционала плотности. Расчёт электронной структуры в приближении локальной плотности с учетом кулоновского потенциала LDA+U показал, что данные системы являются изоляторами с величиной энергетической щели  $E_g = 1.52$  эВ для  $\text{CoCO}_3$  и  $E_g = 2.56$  эВ для  $\text{NiCO}_3$ . Оценка количества d-электронов из парциальной плотности состояний Co и Ni даёт значения  $N = 7.1$  и  $N = 8.1$  соответственно, что указывает на значительную ковалентную связь между состояниями металла и кислорода. Были рассчитаны магнитные моменты на атомах металла, которые составили  $m_{\text{Co}} = 2.63\mu_B$ ,

$m_{Ni} = 1.67 \mu_B$ , при учёте моментов на атомах кислорода мы получаем значение спина  $S = 3/2$  для Co и  $S = 1/2$  для Ni.

Учитывая спин-орбитальное взаимодействие в приближении LDA+U+SO, удается воспроизвести отклонение магнитных моментов от идеальной антиферромагнитной конфигурации в плоскости  $xu$ . Кроме того, величина нескомпенсированного магнитного момента системы находится в разумном согласии с данными экспериментов. В дальнейшем планируется моделирование изменения величины и направления нескомпенсированного момента при помощи внешнего магнитного поля.

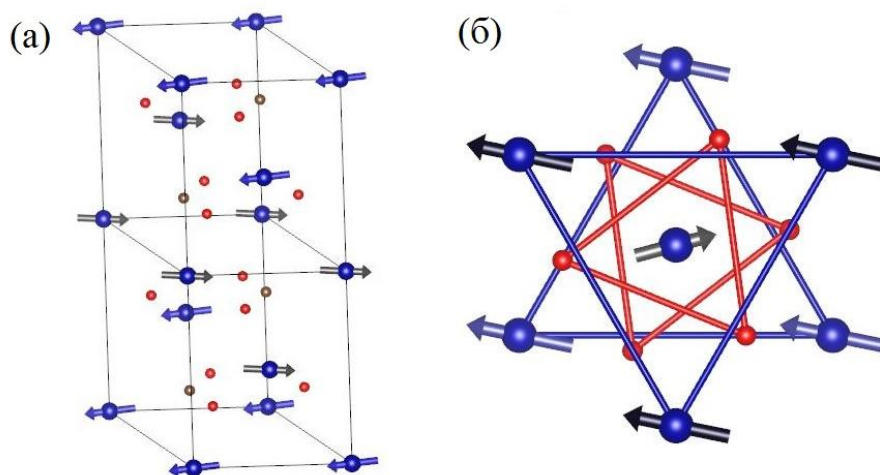


Рис. 1. (а) Электронная структура  $\text{CoCO}_3$ : атомы Co, O и C обозначены синим, красным и серым цветами соответственно, показаны магнитные подрешетки; (б) Вид в плоскости  $xu$ , красным обозначены треугольники кислорода

*Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ № МД-6458.2016.2*

1. Dzialoshinskii I.E. Thermodynamic theory of ‘weak’ ferromagnetism in antiferromagnetic substances. Sov. Phys. JETP 5, 1259–1262 (1957).
2. Moriya T. New mechanism of anisotropic superexchange interaction. Phys. Rev. Lett. 4, 228–230 (1960).

## A NOVEL METHOD OF DESIGN OF MINIATURIZED MICROSTRIP BANDPASS FILTER WITH RESONATORS

Letavin D.A., Konovalov A.L., Chechetkin V.A.\*

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

\*E-mail: [v.a.chechetkin@urfu.ru](mailto:v.a.chechetkin@urfu.ru)

Bandpass filters are used in different stages of the most of RF systems. The requirements for such devices, typically as follows: proper selectivity, small insertion